

Задача №2. Провести теоретическую оценку величины механического вращательного момента, действующего со стороны вращательного магнитного поля на единицу стационарного объема расплавленного металла (магнетика), находящегося внутри статора цилиндрической формы радиуса – R и высоты L. Статор четырех полюсный (число пар полюсов – 2). Ток через обмотки полюсов – двухфазный. Ток I2 сдвинут по фазе на $\pi/4$ относительно тока I1.

Для того, чтобы провести оценку величины механического вращательного момента, действующего на магнетик (расплавленный металл), требуется поясняющий рисунок (рис. 1)

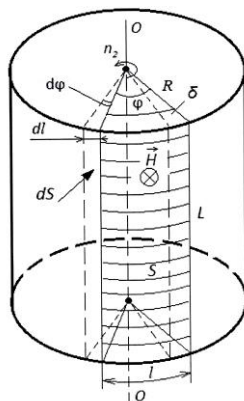


рис.1. Цилиндр магнетика, находящийся между полюсами статора (заштрихованная поверхность цилиндра соответствует площади полюса статора)

Возбуждаемое, таким образом, вращение жидкого металла позволяет изменять условия кристаллизации и получать заданную зерно-границную структуру формируемого слитка за счет слома растущих дендритов, и изменения кинетики образования центров кристаллизации и линейной скорости роста кристаллов.

Новизна данного исследования заключается в том, что большая часть работ связанных с влиянием магнитных полей на кристаллизационные свойства жидких металлов, являются экспериментальными. Теоретических работ по данному направлению, практически, нет. Данный факт затрудняет понимание связи свойств формируемой структуры с внешними и внутренними параметрами, определяющими кинетику и термодинамику процесса кристаллизации.

Список публикаций:

- [1] Вдовин К.Н., Дубский Г.А., Егорова Л.Г. Влияние магнитного поля на процесс кристаллизации алюминиевых расплавов. // Известия высших учебных заведений. Цветная металлургия. 2018. №2. С. 34-42
- [2] Мочанов П.П., Гецелев З.Н. Литье в электромагнитные кристаллизаторы. // Цветные металлы. 1970. №8. С.62, 63.
- [3] Микельсон А.Э., Фолифоров В.М. МГД-методы и устройства в промышленности. // МГ. 1975. №1. с.129-140.
- [4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. // Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред. т.8. М.: Наука, 1982.

Электронное строение деформированных германеновых нанолент

Маринина Екатерина Владимировна

Лебедева Ольга Сергеевна

Волгоградский государственный университет

Лебедев Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н.

y-marinin@mail.ru

Германен - близкий родственник графена, представляющий собой двухмерную кристаллическую решётку из атомов германия [1, 2]. Этот тонкий слой упорядоченных атомов германия способен проявлять ни с чем не сравнимые оптические и электрические свойства и сможет использоваться во многих устройствах электроники в будущем. Разнообразие молекулярных и кристаллических структур на основе германена связано со строением электронных оболочек атома германия, который дает возможность образовывать соединения с различной координацией наподобие атома углерода. Малая запрещенная щель германена поддается управлению электрическим полем, адсорбцией различных атомов, деформацией и взаимодействием с подложкой [1, 2]. Поэтому он может быть использован, например, в качестве материала для полевого транзистора. Германен обладает высокой энергией спин-орбитального взаимодействия (24 мэВ), что приводит к

расщеплению энергетических уровней по спине электрона. Поэтому германен может быть перспективным материалом для спинтроники [1, 2].

В последние десятилетия сформировалось новое самостоятельное научное направление физики конденсированного состояния – стрейнтроника, использующая физические эффекты в веществе, обусловленные деформациями, возникающими в микро-, нано- и гетероструктурах под действием внешних управляющих полей, приводящих к изменению электронного строения, электрических, магнитных, оптических и других свойств материалов [3]. Подобные эффекты позволяют реализовать новое поколение устройств информационных и сенсорных технологий. Например, в работе [4] анонсирована разработка транзистора на базе графена с использованием деформационного изменения баллистической проводимости (эффект пьезопроводимости). Такие полупроводниковые устройства (транзисторы, резисторы, пьезорезистивные сенсоры и датчики давления) могут быть разработаны также на базе других структур семейства графена, деформационные эффекты в которых находятся на стадии изучения.

Целью настоящей работы является исследование электронного строения германеновых нанолент (GeНЛ), деформированных продольным растяжением и сжатием. Для достижения цели решались следующие задачи: построение геометрических моделей GeНЛ; проведение квантово-химических расчетов электронного строения построенных моделей; вычисление упругих характеристик германеновых нанолент (модуль Юнга, коэффициент Пуассона).

Для изучения деформационных эффектов в германене рассмотрен фрагмент поверхности размера 2×3 элементарные ячейки. Разорванные граничные связи насыщались одновалентными атомами водорода. Для расчета электронного строения GeНЛ использовался полуэмпирический метод квантовой химии MNDO [5].

На основе результатов квантово-химических расчётов проведена численная оценка упругих характеристик германеновых нанолент (модуль Юнга, коэффициент Пуассона) на основе зависимости полной энергии E_{total} германеновой наноленты (2, 3) от относительной деформации δ .

Вычисления модуля Юнга (модуля упругости) германеновых наноленты проводилось с использованием методики, развитой в работе [6]. По определению модуль Юнга C рассчитывается по формуле [7]:

$$C = \frac{1}{V_0} \cdot \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \delta^2} \right), \quad V_0 = L_0 H_0 d \quad (1)$$

где V_0 – объем недеформированного кристаллита, E – полная энергия кристаллита, которая аппроксимируется параболической зависимостью:

$$E = K \cdot \delta^2 \quad (2)$$

Путем преобразований формулы (1) с учетом зависимости (2), получаем расчётную формулу для вычисления модуля Юнга:

$$C = \frac{2 \cdot K}{L_0 \cdot H_0 \cdot d} \quad (3)$$

где, C – модуль Юнга (модуль упругости), $K = 6.82$ эВ – эффективный модуль упругости, $L_0 = 19.04$ Å – длина недеформированной GeНЛ, $H_0 = 8.5$ Å – длина недеформированного образца наноленты, d – ковалентный диаметр атома германия $d = 2.4$ Å.

Вычисление эффективного модуля упругости проводилось путем параболической аппроксимации зависимости полной энергии от деформации. Из формулы (3) рассчитывается значение модуля упругости $C = 5.6$ ГПа. Полученное значение коррелирует по порядку величины с модулем Юнга графена, полученным при аналогичных квантово-химических расчетах в работе [6], а также с литературными данными из работы [8].

Рассчитанные значения модуля упругости позволяют сделать вывод о том, что германен является одним из прочнейших материалов и может стать одним из самых эффективных с точки зрения практических разработок представителем графеноподобного класса.

Список публикаций:

- [1] Acun A., Zhang L., Bampoulis P., Farmanbar M., van Houselt A., Rudenko A.N., Lingenfelder M., Brocks G., Poelsema B., Katsnelson M.I., Zandvliet H.J.W. // *J. Phys.: Condens. Matter* 27 (2015) 443002 (11pp).
- [2] Behzad S. // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 229 (2018) 13–19.
- [3] Бухараев А. А., Звездин А. К., Пятко А. П., Фетисов Ю. К. // *УФН*. 2018. Т. 188. № 12. С. 1288.
- [4] McRae A.C., Wei G., Champagne A.R. // *Physical Review Applied* 2019. V. 11. 054019.
- [5] Степанов Н.Ф. *Квантовая механика и квантовая химия*. М.: Мир, 2001. 519 с.
- [6] Перекрестова, К.В. *Электронное строение графеновых нанолент, деформированных растяжением, сжатием. Выпускная квалификационная работа* / К.В. Перекрестова. Волгоград, 2016. – 53 с.
- [7] Лукьянов, С. И., А. В. Бандура, Р. А. Эварестов // *Физика твердого тела*. 2015. Том 57, выпуск № 12. – С. 1-9.
- [8] Lee, C, Wei, X, Kysar, J.W., Hone, J. // *Science*. 2008. Jul 18;321(5887):385 p.